



TITLE:

3.アモルファスセレンの光構造変化(京都大学理学部物理学第一教室,修士論文アブストラクト(1984年度))

AUTHOR(S):

乾, 雅祝

---

CITATION:

乾, 雅祝. 3.アモルファスセレンの光構造変化(京都大学理学部物理学第一教室,修士論文アブストラクト(1984年度)). 物性研究 1985, 44(4): 719-720

ISSUE DATE:

1985-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91645>

RIGHT:

として separatrix に dump させる項と強制周期外力項を加えた系（散逸系）

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = -V'(x) - \delta \left( \frac{1}{2} y^2 + V(x) \right) y + f \cos t \quad \cdots \cdots \cdots (*)$$

（ $\delta$ ,  $f$  は摂動パラメタ）でいくつかのポテンシャルタイプに対して, separatrix の分離により双曲的構造をもった strange attractor の漸近測度を調べた。数値計算の結果は  $1/f$  スペクトルよりもむしろホワイトであった。

次に (\*) で dumping 項を除いた非自励保存系で, separatrix の分離により生じる stochastic layer について調べた。この場合は, separatrix 内部に KAM が残っている時は  $1/f$  スペクトルが得られ, 外力の amplitude の増加に伴い KAM が壊れるとホワイトに近づく。

$1/f$  タイプのスペクトルを与える漸近測度は dissipative な摂動に対して不安定である事が上の結果より示唆される。

### 3. アモルファスセレンの光構造変化

乾 雅 祝

$\text{As}_2\text{S}_3$  等のカルコゲナイドガラスに, 光学ギャップに対応する波長の光を照射するとき, 体積変化を伴って吸収端は低エネルギー側にシフトする。このいわゆる光構造変化の機構を明らかにするため, 我々は最も単純なカルコゲンガラスである 2 配位鎖状構造をもつアモルファス Se ( $\alpha$ -Se) 及び Se に微量 Te, S, As を添加した系を対象として, 室温, 窒素温度で光照射による吸収端のシフトを測定した。

試料としては真空蒸着法で作成した膜厚約  $5 \mu\text{m}$  のものを用いた。300 W タングステンランプを用い, 熱線カットフィルターを通して試料を 1 ~ 4 時間照射し, 吸収係数の値が  $10^3 \sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$  の領域での吸収端の変化を測定した。

$\alpha$ -Se のガラス温度は室温近傍 ( $48^\circ\text{C}$ ) にあるため, 室温での光照射による吸収端のシフトは観測されなかったが, 窒素温度では光照射により吸収端は大きく低エネルギー側にシフトする。そのシフト量は照射時間とともに増大し, ほぼ 3 時間で飽和する。興味あることには, 吸収端のシフトは単なる平行移動ではなく, 吸収係数の小さい領域でのシフトが大きい。低温ではこの状態が保持されるが, 室温までアニールすると元の状態に復し, さらに低温照射を行なうと再びこの現象はくり返される。Se に Te を 5 at % 添加したアモルファス試料では, 吸

収端は  $\alpha$ -Se に比べ低エネルギー側へシフトする。この光学ギャップの減少は、Te の添加により鎖内の  $\sigma$  結合が弱まったためと考えられる。窒素温度での光照射により吸収端はシフトするが、明らかに平行移動ではなく、吸収係数の小さい領域でシフトが著しく大きい。

この結果から、光構造変化は光照射による欠陥生成とそれに伴う格子変形に起因し、観測された吸収端のシフトは吸収端近傍に出現した新しい吸収バンドによると考えられる。S, As を添加した  $\alpha$ -Se の光吸収端のシフトは、Se と類似なふるまいを示す。

#### 4. Vector Charge Density Wave (VCDW)

モデルによる trigonal Se, Te の電子－  
格子構造とクーロン相互作用の効果

岡 達 治

電子相関の効果を取り入れて、Se, Te の物性を microscopic な立場から説明を試みた VCDW モデルに基づき、CNDO-UHF 近似によって trigonal Se, Te の Selfconsistent な電子－格子状態を解析する。

格子変形の効果を含まない cubic P バンドのフェルミ面は、非常に nesting を起こしやすい構造をしているが、incommensurate な nesting vector を持ち、むしろ defect をつくって soliton lattice 的になった方が安定になる可能性があることが示唆される。

effective on-site クーロン相互作用によって、valence P バンドは weak correlation 領域と strong correlation 領域の二段階で安定化される。しかし格子変形の効果が入っても VCDW が誘起されても、trigonal Se, Te のバンド構造はほぼ cubic P バンドの特徴によって支配されている。

effective on-site クーロン相互作用項のみを取り入れた SCF 計算を行うと、CNDO 近似によってイオン化エネルギーと電子親和力から求めた on-site クーロン反発積分をそのまま使うとギャップが大きすぎて実験に合わないが、スクリーニングを仮定 (Se 27 %, Te 42 %) すれば、strong correlation 領域で XPS, 光学ギャップの実験データを説明することができる。

さらに大野型ポテンシャルを用いて、nearest neighbor 交換相互作用項まで含めた完全な SCF 計算を行うと、on-site, nearest neighbor クーロンポテンシャルに対して dielectric 型のスクリーニングを仮定 (Se 50 %, Te 66 %) すれば、weak correlation 領域で XPS, 光学